

平成23年度 科学研究費補助金（特別推進研究）
研究進捗評価 現地調査報告書

研究課題名	有機半導体分子の合成とナノ組織化による高効率光電変換
研究代表者名 (所属・職)	中村 栄一（東京大学・大学院理学系研究科・教授）

【評価コメント】

高効率有機薄膜太陽電池の開発は緊急課題である。本研究グループの研究進捗状況は、(1)論文発表（平成22年に6報、平成23年に15報、うち一流ジャーナル *J. Am. Chem. Soc.* に11報と優れる）と(2)装置購入整備（平成22年度申請分は全て東京大学に設置、稼働中）は極めて順調である。(3)研究体制構築に関して研究分担者1名が他大学に異動し、外国人ポスドク2名を解雇（平成23年度分割払いによる当初送金額が7割のため）したが、連携研究者を拡充することで補強している。ただし、当初送金額が7割であったことや原発事故などが起因となり優秀な外国人研究者の雇用が今後不安定化すると研究代表者は憂慮している。(4)学術の面では、解決すべき課題を整理し、問題点と解決法の具体化（人、物質、装置、技術など）と研究ステージのロードマップを作成し、研究はスムーズに進捗している。ただし、本研究は先端問題を扱い、解決すべき学問・技術課題は山積している。

研究代表者の研究計画にある通り、変換効率を飛躍的に向上させるためには、光により高効率でキャリア生成・輸送ができる独創的な分子及び分子集合体を設計・合成し、また有機物/電極界面でキャリア注入バリアを極小とできる接触面構造の構築やエネルギー準位の整合が必要であり、安価なデバイス作成のための溶解性分子の大量合成が不可欠である。本研究グループは、研究分担者に三菱化学の主幹研究員、産業技術総合研究所の研究員を含み、基礎からデバイス作成までの遂行を計画し（完全な実用化は本研究の延長上に想定）、以下の課題をあげている。

1. 科学：キャリア生成の高効率化（光吸収、電荷分離、電荷収集）、近赤外色素開発、エネルギー準位制御、キャリア収集のためのタンデム構造、光閉じ込め構造
2. 基礎技術：印刷技術・塗布プロセスの高度化、表面界面物性制御技術、フレキシブル基板材料
3. 工業化技術：大量合成、モジュール製造技術、薄膜印刷技術

研究目的に合致した課題内容の仕分けである。

以下に、高効率有機薄膜太陽電池の開発が緊急課題であるとの点から、いくつかのコメントを記す。

- ・新規分子の合成：蒸着ではなく塗布を目的とした場合の可溶性ドナー分子の設計指針（ポルフィリン類は一般に難溶）の明確化が必要。
- ・近赤外光までの利用に関する論理的設計指針（孤立分子の電子状態、集合体中での分子パッキング・分子配向制御、バンド構造、デバイス構造など）の明確化が必要。
- ・表面界面構造・物性制御：本グループは分子の合成を通して分子の電子構造や分子構造を制御する能力は充分であるが、分子集合体中での特異的高次構造体（バンド形成が必須ならばドナーやアクセプター分子の分離積層構造が不可欠）を得るための分子設計、分子パッキング制御、集合体の電子状態（バンド構造）の設計制御、表面界面における分子配列を測定する技術・装置に長けた研究者との協力が不可欠。
- ・キャリアの生成・輸送：キャリア生成の各ステップの支配パラメータを分子、集合体、界面の総合的視点から理解している理論研究者との協力が必須。